

АВТОМАТИЗАЦИЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО РФА ДЛЯ ОБРАЗЦОВ СО СЛОЖНЫМ ФАЗОВЫМ СОСТАВОМ

Чижев П.С.

Московский Государственный Университет, Химический Факультет, г. Москва, pavel.chizhov@gmail.com

Развитие метода рентгенофазового анализа обусловлено двумя основными факторами: развитием аппаратной базы, позволяющей экспрессно регистрировать дифрактограммы высокого качества, и совершенствованием алгоритмов обработки дифрактограмм. Оба упомянутых фактора в существенной мере определяют автоматизацию рентгенофазового анализа как следующий этап развития порошковой рентгеновской дифракции. Сложность автоматизации качественного РФА в настоящее время избыточно высока – попытки использования нейронных сетей (напр., [Griffen, 1999]) для этих целей носили пробный характер, и даже авторы [Iwasaki et al., 2017] рассматривают подход как пионерский. Автоматизация количественного РФА, во многом требовательная к вычислительным ресурсам, может быть реализована уже в настоящее время.

В настоящей работе предлагается оригинальный подход к автоматизации РФА, реализованный в программном обеспечении (ПО) XRDServer, основанный на использовании множества наборов начальных приближений в полнопрофильном анализе с дальнейшим

определением наилучшего результата по значению χ^2 . Выбор множества наборов начальных приближений определяется путем применения гибких семантических правил к имени файла дифрактограммы, причем возможен программный контроль появления новых файлов с их последующей автоматической обработкой. Результаты уточнения сохраняются в отдельный каталог и могут быть просмотрены позднее; данные о фазовом составе записываются в отдельный файл формата MS Excel, причем возможно и автоматическое создание графического отчета в формате MS Word. Также в программном обеспечении реализован метод G-фактора для расчета абсолютных массовых долей фаз и доли/состава аморфной фазы в образце.

Программа прошла апробацию в условиях заводских лабораторий и лабораторий, занимающихся прикладными исследованиями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Griffen D.T., Clay Min., 34(1999), 117.
2. Iwasaki Y. et al., NPJ Comp.Mat., 3(2017), 4.